

ЧАСТИНА ПРОГРАМИ, ЩО ВИКЛАДАЄТЬСЯ НА КАФЕДРІ ХІМІЧНОГО МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА

Розділ 2. Лекції (частина 1)

Тема 6. Молекулярна спектроскопія УФ і видимій області

Електронні спектри поглинання. Частотні інтервали. Уявлення про колір речовини. Співвідношення між основними і додатковими кольорами. Феноменологічні характеристики спектрів: інтенсивності, спектральні зсуви. Поняття про хромофор і ауксохром. Закон Бугера-Ламберта-Берра та його порушення.

Квантово-хімічна теорія електронної спектроскопії. Основне і збуджені стани. Енергії переходів, перехідні моменти, сили осциляторів. Основні характеристики електронно-збуджених станів (геометрія, дипольні моменти, зарядовий розподіл, локалізація збудження). Електронно-коливальні переходи. Принцип Франка-Кондона. Орбітальна природа електронних переходів. Типові спектри поглинання.

Зв'язок молекулярної структури і спектрів. Спектроскопія комплексних сполук. Природні органічні пігменти. Бензольне поглинання (Систематика переходів за Кларом і Платтом). Ціанінові барвники, халкони, донорно-акцепторні похідні бензолу і нафталіну. Трифенілметанові барвники. Ефект Кіпріанова. Адитивні схеми розрахунку спектрів.

Вплив розчинників на електронні спектри поглинання. Поляризаційно-континуальна модель. Сольватохромія бетаїну.

Техніка експерименту: призмові спектральні прилади, спектральні прилади з дифракційними решітками (гратками); однопроменеві спектрофотометри, двопробеневі спектрофотометри для УФ- і видимої області, двоххвилові спектрофотометри.

Похибки спектрофотометричних вимірювань. Способи підвищення точності вимірів. Спектроскопія з диференціюванням (похідна спектроскопія), різницева спектроскопія і двоохвилова спектроскопія.

Розділ 2. Лабораторні заняття (частина 2)

Тема 7. Дослідження електронних спектрів поглинання неорганічних та органічних речовин та матеріалів (використання кювет змінної товщини, похідна спектроскопія, дослідження форми спектральних кривих органічних речовин в залежності від різних агрегатних станів тощо).

Математичний аналіз структури спектрів поглинання та випромінювання органічних і неорганічних речовин.

Тема 8. Фотометричне титрування (дослідження залежності спектру поглинання і оптичної густини фенолового червоного при 550 нм від рН).

Визначення константи іонізації тимолового синього спектрофотометричним методом.

Тема 9. Визначення вмісту кофеїну в чаї

Тема 10. Харчові барвники в продуктах харчування та лікарських засобах – виявлення та встановлення концентрації.